DEEP LEARNING
for Earth Sciences

Святослав Елизаров

Институт океанологии им. П.П. Ширшова РАН

ОБУЧЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

Остаётся решить как мы будем вычислять градиент. Необходимо найти некоторый универсальный способ представления функций, удобный для вычисления частных производных.

Вычислительным графом (computational graph) называется направленный ациклический граф в вершинах которого находятся операции из которых состоит исходная функция. Направление в графе отражает зависимость значений одних вершин от других.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

Вычислительные графы позволяют:

- повторно использовать промежуточные результаты
- транслировать описанные функции в реализации на разных языках

Вычислительные графы используются в большинстве современных библиотек для deep learining.

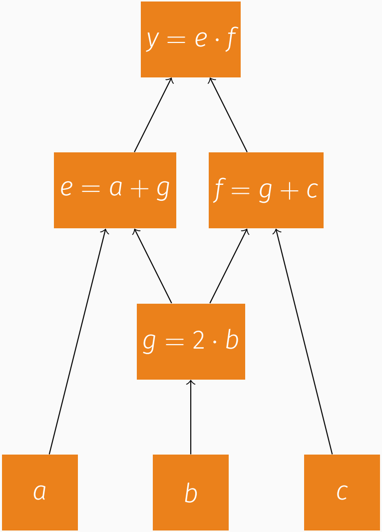
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

Например возьмём функцию $y = (a + 2b)(2b + c)$

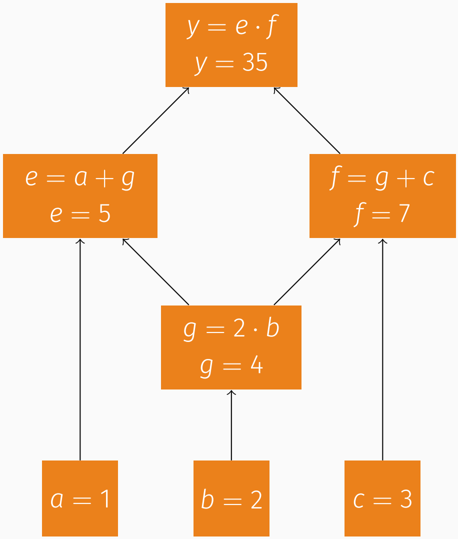
Она состоит из четырёх операций, следовательно в графе будет четыре вершины (и три входа). Выпишем их:

$$g = 2 \cdot b$$
$$e = a + g$$
$$f = g + c$$
$$y = e \cdot f$$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

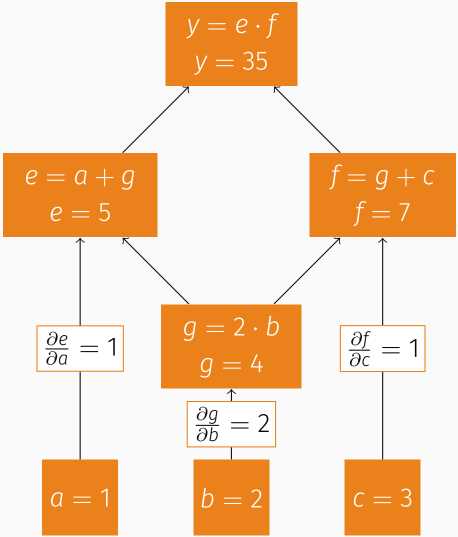


ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

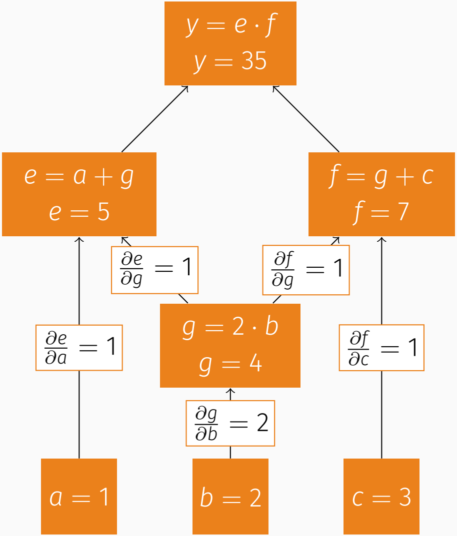
Как видно из примера, значения узла g было рассчитано один раз, но использовалось дважды.

Теперь вычислим градиент функции y.

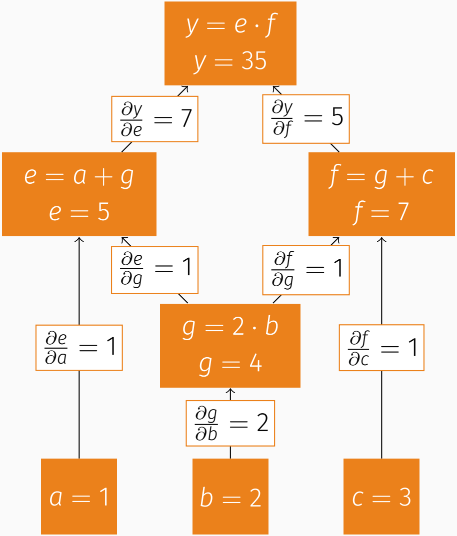
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

Теперь воспользуемся цепным правилом и вычислим $\frac{\partial y}{\partial a}$, $\frac{\partial y}{\partial b}$ и $\frac{\partial y}{\partial c}$:

$$\frac{\partial y}{\partial a} = \frac{\partial y}{\partial e} \cdot \frac{\partial e}{\partial a} = 7$$

$$\frac{\partial y}{\partial b} = \frac{\partial y}{\partial e} \cdot \frac{\partial e}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial b} + \frac{\partial y}{\partial f} \cdot \frac{\partial f}{\partial g} \cdot \frac{\partial g}{\partial b} = 24$$

$$\frac{\partial y}{\partial c} = \frac{\partial y}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial c} = 5$$

Какова сложность этого алгоритма?

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

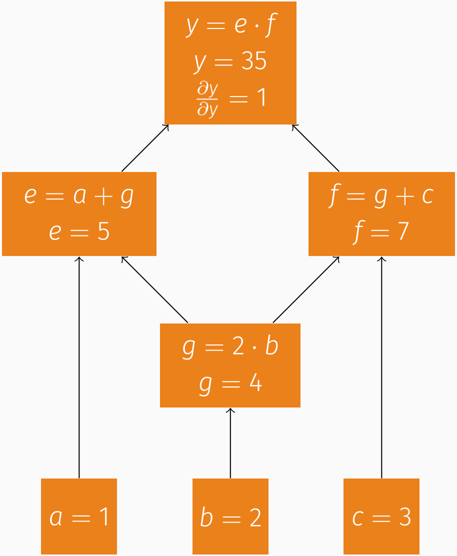
Что с этим делать?

Что с этим делать? Применим динамическое программирование!

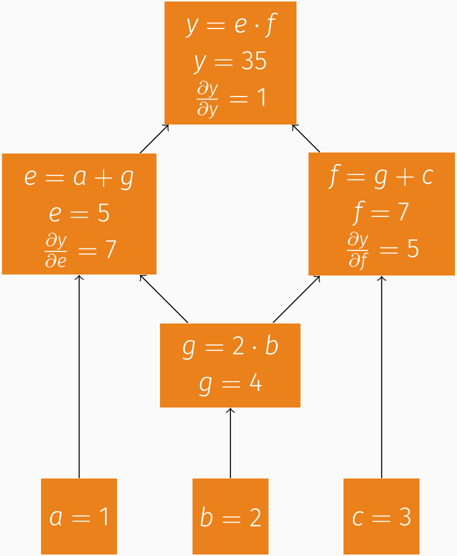
Будем считать частные производные с конца, используя полученную на предбудущих шагах информацию для вычисления значений.

Другими словами, мы будем последовательно применять $\frac{\partial y}{\partial \cdot}$ к каждому узлу.

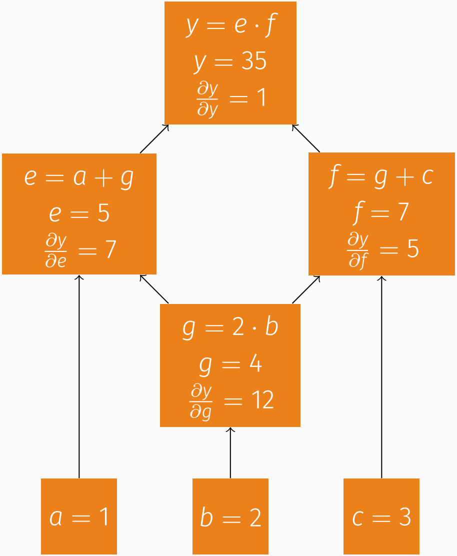
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



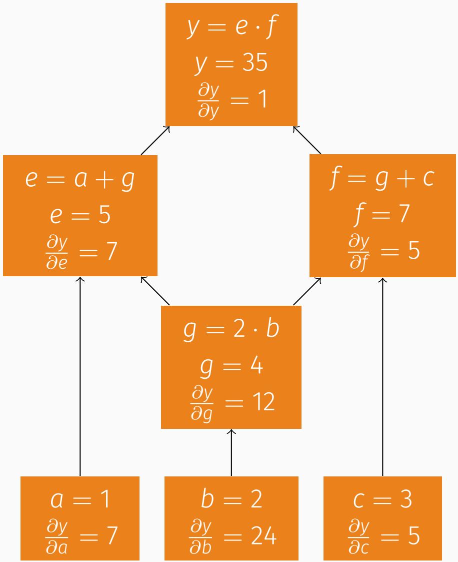
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ

Таким образом мы смогли сразу получить *все* необходимые частные производные.

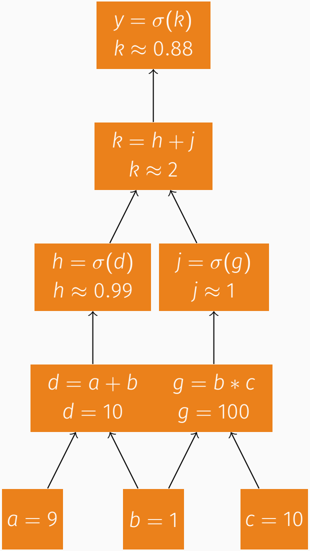
Данный подход называется алгоритмом **обратного распространения ошибки** (error backpropagation).

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ

ПРИМЕР

- Вычислим градиент функции $y = \sigma(\sigma(a + b) + \sigma(b * c))$ при помощи метода обратного распространения ошибки
- Примем $a = 9, b = 1, c = 100$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ПРИМЕР

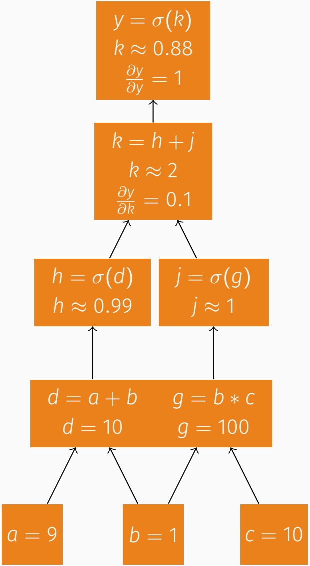
Найдём производную $\sigma(x)$ по x:

$$\sigma(x)' = \frac{1}{1+e^{-x}}' = \frac{0(1+e^{-x}) + 1(0+e^{-x})}{(1+e^{-x})^2} = \frac{e^{-x}}{(1+e^{-x})^2}$$

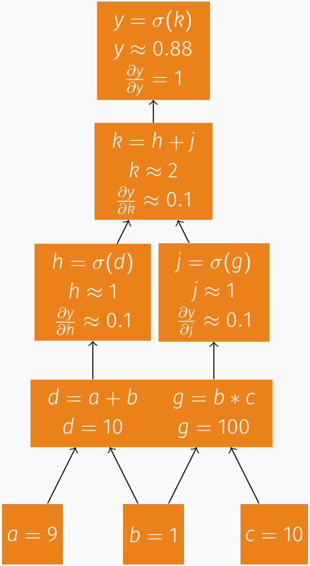
Или

$$\sigma(x)' = \sigma(x)(1-\sigma(x))$$

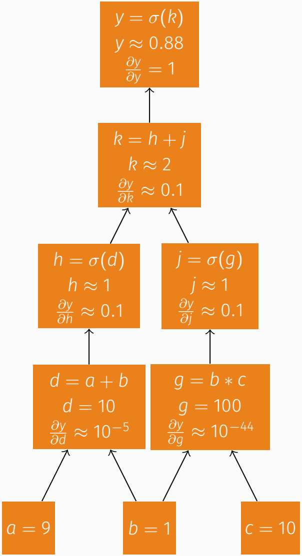
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ГРАФ



ПРИМЕР

Дальше можно не считать, очевидно, что:

$$\nabla y(a, b, c) \approx (0, 0, 0)$$

Если бы это была функция потерь нейронной сети, о чем бы это говорило?

ПРИМЕР

Данная проблема называется проблемой **исчезающего градиента** (vanishing gradient problem).

В рассмотренном примере использовалась функция $\sigma(x)$, максимальное значение, которое может принять её производная равно 0.25.

В глубокой нейронной сети, использующей сигмоид в качестве функции активации между слоями, градиент с большой вероятностью будет исчезать.

Важно понимать как работает алгоритм обратного распространения и как ведут себя производные функций активации, которые вы используете!